

QSAR Toolbox v.4.4 インストールマニュアル

本翻訳物は、OECD より出された、：

QSAR Toolbox User Manual Toolbox 4.4 Installation Manual

(<https://qsartoolbox.org/wp-content/uploads/2020/02/Toolbox-4.4-Installation-Manual.pdf>)

を NITE が仮訳したものです。

本翻訳は NITE の仮訳であり、正確には原文をあたってください。原文と本翻訳に相違がある場合は、原文を優先してください。

日本語訳

© 2020 National Institute of Technology and Evaluation (NITE)

ドキュメント履歴

Version	Comment
Version 1.0	March 2017: Installation notes for Toolbox version 4.0
Version 1.1	August 2017: Updated to reflect changes in version 4.1
Version 1.2	January 2018: Updated to reflect changes in version 4.2
Version 1.3	February 2019: Updated to reflect changes in version 4.3
Version 1.4	February 2020: Updated to reflect changes in version 4.4

(原文) 発行日 : 2020 年 2 月

言語 : 英語

(仮訳) 発行日 : 2020 年 12 月

言語 : 日本語

このドキュメントに関連する質問やコメントがある場合は、以下に送信してください。

ehscont@oecd.org 又は次の QSAR Toolbox ディスカッションフォーラムにアクセスしてください。

https://community.oecd.org/community/toolbox_forum

目次

ドキュメント履歴.....	2
目次	3
I. QSAR Toolbox インストールの概要と利用環境	4
1. 概要.....	4
2. 利用環境	4
II. QSAR Toolbox のインストール	4
1. ステップ1 PostgreSQL	6
2. ステップ2 Microsoft .NET Framework 4. 7. 2	8
3. ステップ3 データベース.....	9
4. ステップ4 QSAR Toolbox	11
III. 今までお使いの Toolbox バージョンから新しいバージョンへのカスタムアイテム転送方法.....	18
1. QSAR Toolbox 3.x から QSAR Toolbox 4. 4 へのカスタムアイテム転送方法	18
2. QSAR Toolbox 4.x から QSAR Toolbox 4. 4 へのカスタムアイテム転送方法	21
IV. 今までお使いの Toolbox バージョンの削除方法	23
1. QSAR Toolbox 3.x の削除.....	23
2. QSAR Toolbox 4.x の削除.....	23
V. OASIS メタパスについて	25
VI. 現行の問題点について	25

I. QSAR Toolbox インストールの概要と利用環境

1. 概要

このドキュメントでは、Microsoft® Windows®を使用しているパソコンでの QSAR Toolbox（バージョン 4.4）セットアップキットのインストール手順をステップごとに説明します。

新しい QSAR Toolbox 4.x は、Toolbox 3.4 コードベースを継承していません。これは新しいシステムであり、基礎から設計され、新しい基盤技術とデータベース管理サブシステムを使用して書き換えられています。

これは、以前のバージョンとはまったく異なります。

QSAR Toolbox 4.4 は、Toolbox のメジャーアップデートであり、4.x の以前のバージョンと同じパソコンにインストールできます。

2. 利用環境

パソコンは 64 ビットオペレーティングシステム（必須）と 2.4 GHz 以上で動作するプロセッサ、ストレージ用の 15GB のハードディスク領域及び 6GB の RAM を備えた最新版をご用意することをお勧めします。

このインストールを実行するには、ローカルパソコンの管理者権限が必要です。ただし、インストールについてアプリケーションを実行するには通常のユーザー権限で十分です。

以下がインストールされていない場合、パソコンにインストールしてください。

- データベースマネージャーPostgreSQL 9.6
- Microsoft .NET Framework 4.7.2

II. QSAR Toolbox のインストール

Toolbox のインストールを開始する前に、ダウンロードしたパッケージにすべてのファイルがあるかを確認してください。

アプリケーションを受け取った CD 又はパッケージをダウンロードしたフォルダに移動します。パッケージを右クリックし、コンテンツを新しいディレクトリに“extract the content”（内容を取り出す）を選択します。

ダウンロードしたパッケージから直接 Toolbox のインストールを開始しないでください。

注：インストールパッケージは、WinZip ソフトウェアバージョン 17 を使用して圧縮しています。
アプリケーションごとに ZIP 形式の実行方法が異なるため、他のアプリケーションではパッケージを解凍できない場合があります。インストーラパッケージをテストした無料の代替アプリケーションは 7-Zip です。7-Zip は <http://www.7-zip.org/> からダウンロードできます。

QSAR Toolbox 4.4 は、Toolbox のメジャーアップデートであり、4.x 以前のバージョンと同じパソコンにインストールできます。

Toolbox 4.以前（つまり、バージョン 4.0、4.1、4.2、4.3）のいずれもインストールしていない場合、QSAR Toolbox の 4 つの基本コンポーネント 1) PostgreSQL9.6、2) .NET Framework 4.7.2、3) Database、4) QSAR Toolbox アプリケーションをインストールする必要があります。以前の Toolbox のバージョンがインストールされている場合は、ステップ 1 と 2 をスキップして、ステップ 3 Database から開始してください。

“StartInstall.exe”ファイル（図 1）（パッケージから抽出されたコンテンツを保存したディレクトリにあります）をダブルクリックし、以下で説明する手順に従ってください。

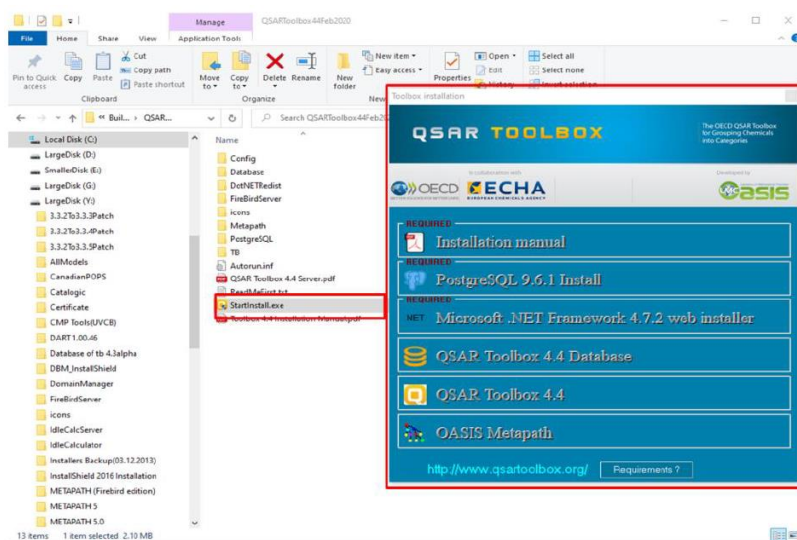


図 1. インストールの起動画面

1. ステップ 1. PostgreSQL

ステップ 1.1. “PostgreSQL 9.6.1 Install”をクリックします。(図 2)



図 2. PostgreSQL のインストールの開始

ステップ 1.2. PostgreSQL のインストールとデータを保存する場所を選択するよう求められます。デフォルト設定のままにし、“Next>” (次へ) を 2 回クリックします (図 3)。

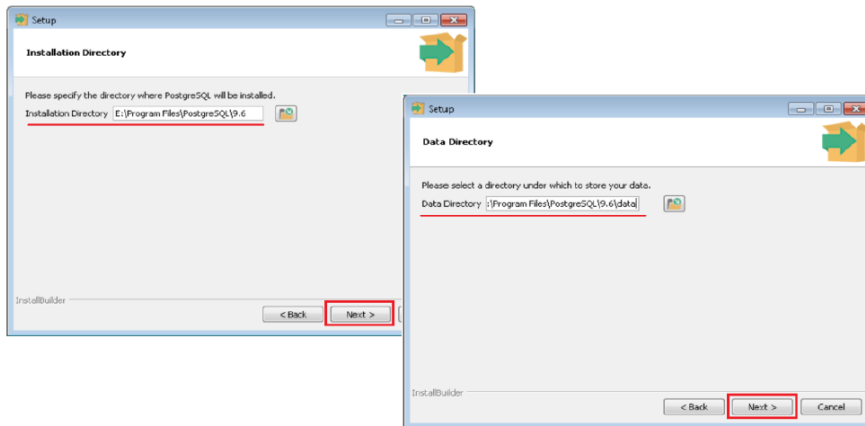


図 3. PostgreSQL のインストールとデータを保存するフォルダの選択

注：データフォルダに少なくとも 5GB の空き容量があることを確認してください。

ステップ 1.3. 次に、パスワードとポートの入力を求められます（図 4）。

パスワード：postgres（推奨）

ポート：5432（デフォルト）

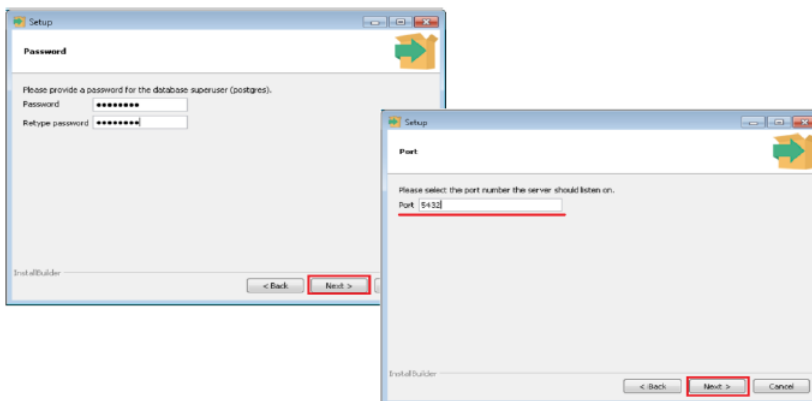


図 4 PostgreSQL のパスワードとポートの指定

注：パスワード/ポートは必ず書き留めるか、覚えておいてください。
インストール手順の後半や、PostgreSQL インストール中に必要になります。

ステップ 1.4. 最後に、“Launch Stack Builder”のチェックを外して、“Finish”（完了）をクリックします（図 5）。

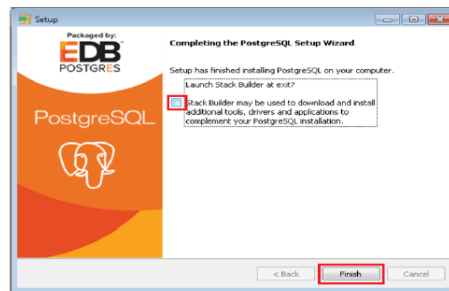


図 5. Stack Builder のチェックを外して、PostgreSQL のインストールの完了

これで PostgreSQL がインストールされ、Toolbox データベースのインストールを続行できます。

2. ステップ 2. Microsoft .NET Framework 4.7.2

Microsoft .NET Framework 4.7.2 Web インストーラーをクリックして、画面の指示に従います。

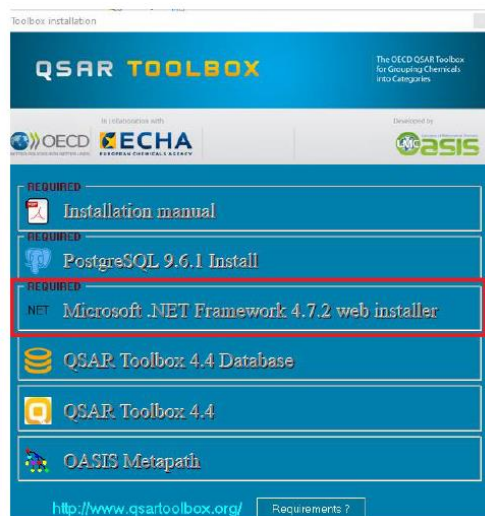


図 6. Microsoft .NET Framework のインストール

3. ステップ 3. データベース

ステップ 3.1. “QSAR Toolbox 4. 4 Database”を選択します。(図 7)

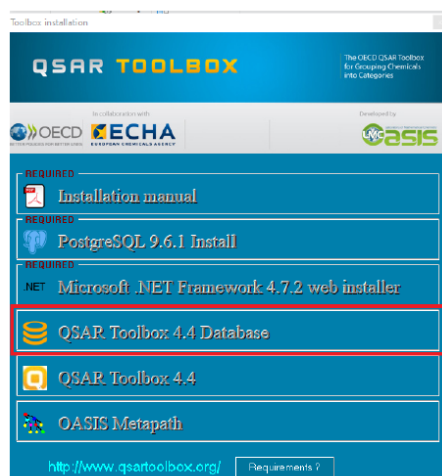


図 7. Toolbox データベースのインストール開始

ステップ 3.2. PostgreSQL のスーパーユーザーパスワードと既知のポートを提供するように求められます (図 8)。(1.3 を参照) :

-password には、**postgres** (推奨) を入力

-p には、**5432** (デフォルト) を入力し、“Deploy”ボタンをクリックします。

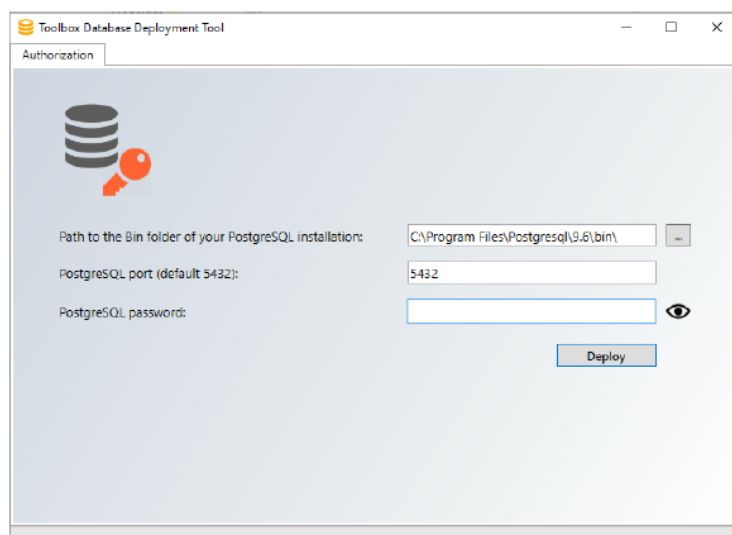
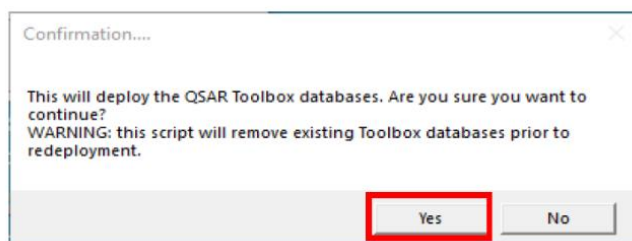


図 8 データベース展開の開始

注：変更したパスワードを覚えていない場合は、次のリンクにある手順に従って、PostgreSQL パスワードをリセットしてください。

<http://toolbox.oasis-lmc.org/content/documents/ResettingPostgreSQLPassword.pdf>

ステップ 3.3. 次の確認メッセージがでてきたら、“Yes” (はい) をクリックします (図 9)。この確認メッセージは、同じバージョンの Toolbox にも関連しています。Toolbox 4.4 データベースの展開は、以前のデータベースには影響しません。



ドキュメントバージョン 1. 4

2020 年 2 月

図 9 .データベースの展開を開始するための確認メッセージ

データベース全体の展開には、コンピューターの設定に応じて約 10～15 分かかりますので、中断しないでください。

注：データベースを展開する前に、PostgreSQL サーバーが機能していることを確認してください。それを確認するには、タスクマネージャーの[サービス]タブに移動します（Ctrl + Shift + Esc ボタンを押して起動できます）。名前に postgresql が含まれるサービス（例：「postgresql-x64-9.4」）を探し、ステータスが “Running”（実行中）と表示されているか確認してください。

Toolbox のインストールの最後のステップに進みます。

4. ステップ 4. QSAR Toolbox

ステップ 4.1. “QSAR Toolbox 4. 4” を選択します。（図 1 0）

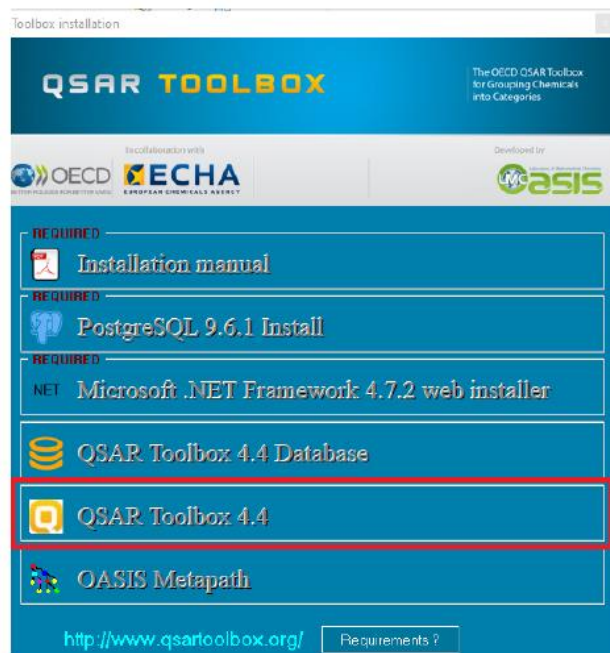


図 10. Toolbox アプリケーションのインストール開始

ステップ 4.2. “Next>” (次へ) をクリックして、Toolbox のインストールを開始します (図 11)

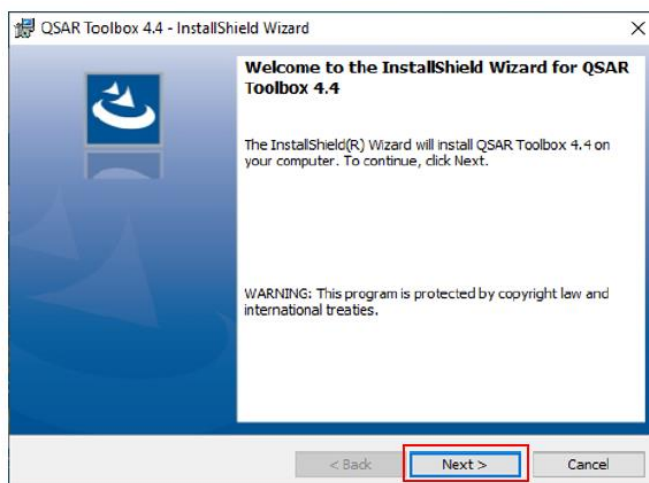


図 11 . InstallShield Wizard 画面

ステップ 4.3. Toolbox のインストールを続行するには、ライセンス契約の条項に同意します（図 12）。

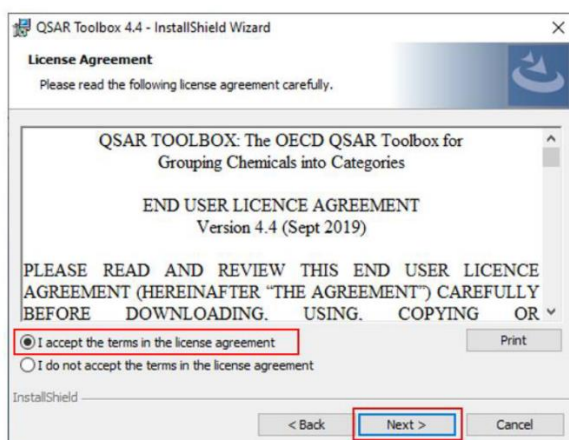


図 12. ライセンス契約

ステップ 4.4. Toolbox の保存先フォルダを求められます。“Next>”（次へ）をクリックして、Toolbox をデフォルトのディレクトリにインストールします（図 13）

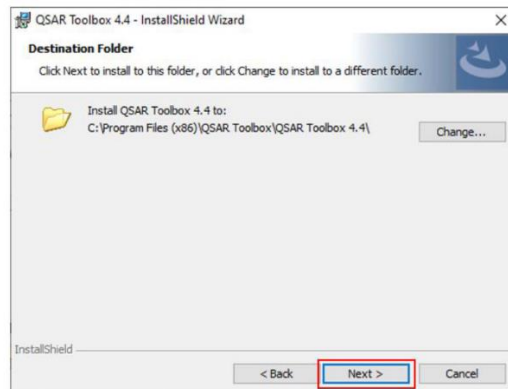


図 1 3 .Toolbox の保存先フォルダの選択

ステップ 4 .5. 次に、インストール様式の展開モードを選択するように求められます。QSAR Toolbox 4 には、Standalone、クライアントのみ、又はマルチユーザーサーバーの 3 つの展開モードがあります。

・**Standalone** : この展開モードは、1 台のコンピューターでのみ Toolbox を使用する場合です。この展開モードでは、新しいプロファイリングスキームの作成、データベースのインポート及び新しい QSAR の作成が可能です。これは、プロファイリングスキーム、QSAR、データベースを開発するユーザーに推奨される展開モードです。

・**QSAR Toolbox デスクトップクライアントのみ** : この展開モードでは、Toolbox クライアントのみがインストールできます。QSAR Toolbox マルチユーザーサーバーのそれぞれ個別の展開に接続する必要があります。

・**QSAR Toolbox マルチユーザーサーバー** : この展開モードは、QSAR Toolbox のサーバーレイヤーとクライアントレイヤーの両方をインストールするという点で、スタンドアロンの展開に似ていますが、サーバーをマルチユーザーモードで構成します。マルチユーザーサーバーに接続すると、ユーザーは新しいプロファイルの作成やデータベースのインポートなどの特定の機能に制限がかかります。

注 : 着信接続用のポートを開くには、管理者権限 (又は同等の権限) でマルチユーザーサーバーを起動する必要があります。

ここでは 1 台のコンピューターで使用される場合に用いる **Standalone** 展開モードを例にとります。

"**Standalone**"を選択し、"Next>" (次へ) をクリックします (図 1 4) 。

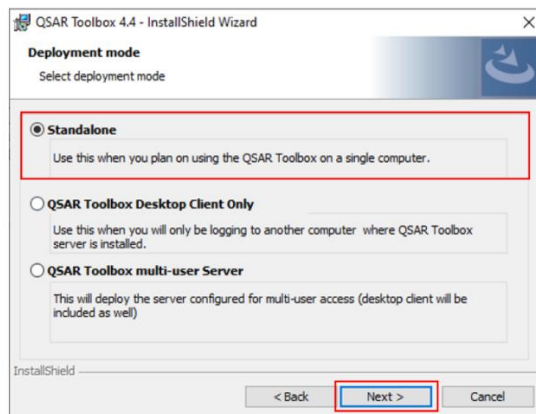


図 14 .Toolbox の展開モードの選択

ステップ 4.6. 次に、クライアントアプリケーションとサーバーアプリケーションの接続パラメーターを入力するよう求められます。データベースポートが同じであることを確認し（デフォルトでは 5432）、「Next>」（次へ）をクリックして（図 14）、インストールを完了します。

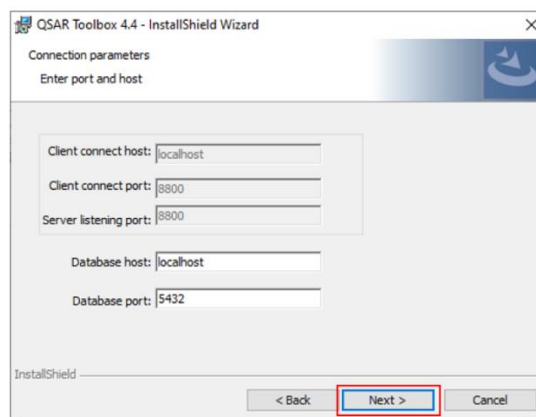


図 15 .接続パラメーターの入力

パラメーターの意味：

- ・**Client connect host**（クライアント接続ホスト）：クライアントが接続するコンピューターを指します。
- ・**Client connect port**（クライアント接続ポート）：クライアントがサーバーへの接続に使用するポートです。サーバーが受信待ちするように構成された**listening port**と一致する必要があります。
- ・**Database host**（データベースホスト）：PostgreSQLデータベースがあるホストコンピューターを指します。
- ・**Database port**（データベースポート）：PostgreSQLデータベースサーバーの受信待ちするポートを指します（PostgreSQLインストールセクションを参照）。
- ・**Server listening port**（サーバーリスンポート）：QSAR Toolboxサーバーの受信待ちするポートです（及びToolboxクライアントは接続を試せます）。

ステップ4.7. “**Install**”（インストール）をクリックしてから“**Finish**”（完了）をクリックして、Toolboxアプリケーションのインストールを完了します（図16）。

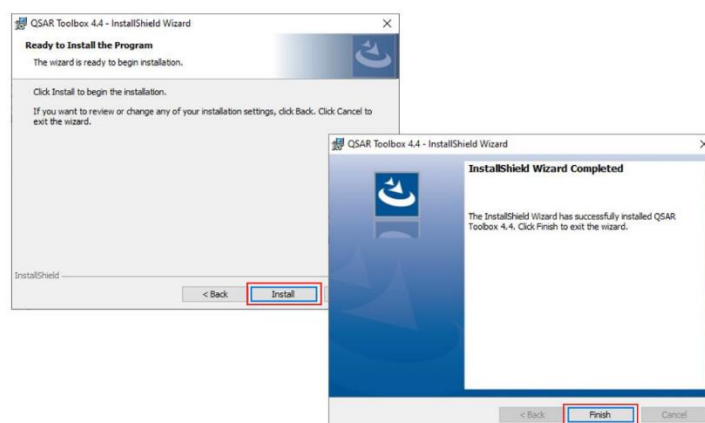


図16 .Toolboxアプリケーションのインストールの完了

これで、Toolboxの適切な動作に必要なすべてのコンポーネントがインストールされ、システムを実行できます。

注：QSAR Toolbox クライアントがローカルサーバーに接続している場合、まだ開始されていない場合、QSAR Toolbox サーバーが起動します。

III. 今までお使いの Toolbox バージョンから新しいバージョンへのカスタムアイテム転送方法

1. QSAR Toolbox v.3.x から QSAR Toolbox v.4.4 へのカスタムアイテム転送方法

QSAR Toolbox v.3.xからQSAR Toolbox v.4.4へカスタムアイテム（プロファイラーとデータベース）を転送するには、2つのツールをご利用になれます。

a. カスタムプロファイラーの転送

Scheme Migrator Appパッケージ（カスタムプロファイリングスキームの転送を可能にするツール）は、次のリンクからダウンロードできます。

<http://toolbox.oasis-lmc.org/downloads/tools/SchemeMigratorApp.zip>

パッケージのコンテンツを抽出した後、SchemeMigratorApp.exeファイルをQSAR Toolbox 3.4のインストールで作成されたCOM34フォルダに手動で配置する必要があります。

COM34フォルダへのデフォルトパスは、%PROGRAMFILES (X86) %¥ OASIS-LMC ¥ COM34 です（例：C : ¥ Program Files (x86) ¥ OASISLMC ¥ COM34）（図17）。

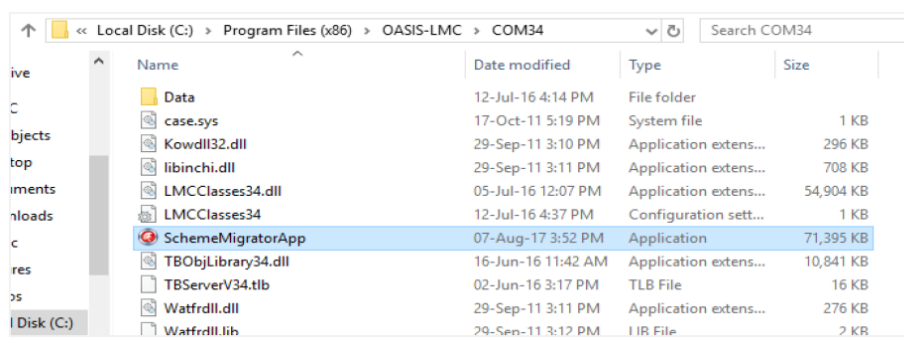


図17. COM34フォルダのデフォルトディレクトリにあるScheme Migratorアプリの実行可能ファイル（QSAR Toolbox v.3.4）

SchemeMigratorApp.exeファイルを実行してプログラムを起動します。

複数のToolbox 3.x スキームを“Load schemes”（スキームのロード）ボタン（1）を使用して読み込みできます（図18）。スキームを順次読み込むと、スキームがリストに追加されます。

スキームのリストは“Clear list”（リストのクリア）ボタン（2）を使用して削除できます。

スキームが読み込まれたら、“Convert!”（変換）ボタン（3）をクリックして変換できます。

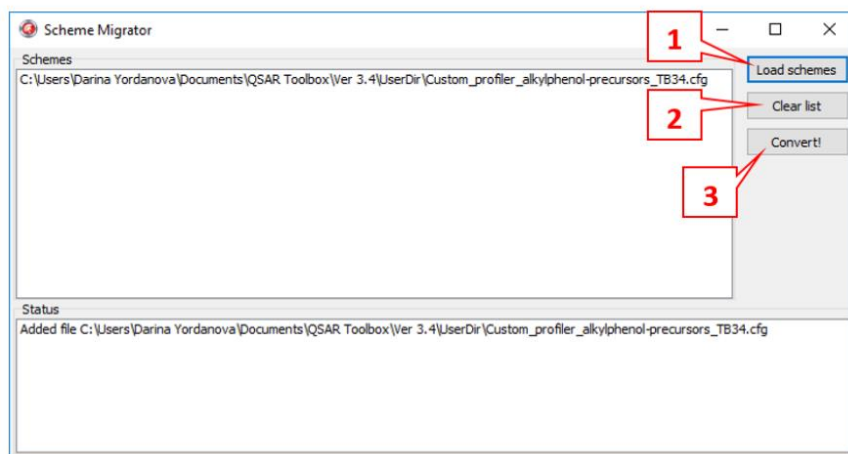


図18. Scheme Migrator App画面

変換プロセスには、入力スキームの数、サイズ、複雑さ及びコンピューターのハードウェアに応じて、数秒から数分かかる場合があります。変換プロセスが完了すると、各スキームのステータスログがステータスの領域に表示され、操作が成功したかどうか通知されます。

変換が成功した場合、変換されたスキームごとに新しいファイル（.plugin.config）が作成されます。QSAR Toolbox 4.4で変換されたスキームを使用するには、CONFIGフォルダに配置する必要があります。

デフォルトのパスは次のとおりです。

C:\Program Files (x86)\Common Files\QSAR Toolbox 4.4
\Config\Addins\LMC.Toolbox.Server.Profiling

Scheme Migrator Appの詳細については、ダウンロードしたパッケージに含まれているユーザーマニュアルを参照してください。

b. カスタムデータベースの転送

Database Migration Tool（つまり、古いToolboxデータベースの転送を可能にするツール）を含むパッケージは、QSAR Toolboxのウェブサイトからダウンロードできます。

[Download Database Migration tool](#)

Database Migration Toolは、ユーザーデータベースとインベントリを既存のデータベースに転送するために構築された、非常に基本的で使いやすいユーザーインターフェイスを備えたアプリケーションです。

ツールがダウンロードされましたら、パッケージのコンテンツを抽出し、“ToolboxDatabaseCopy4”実行ファイルをダブルクリックします（図19）。

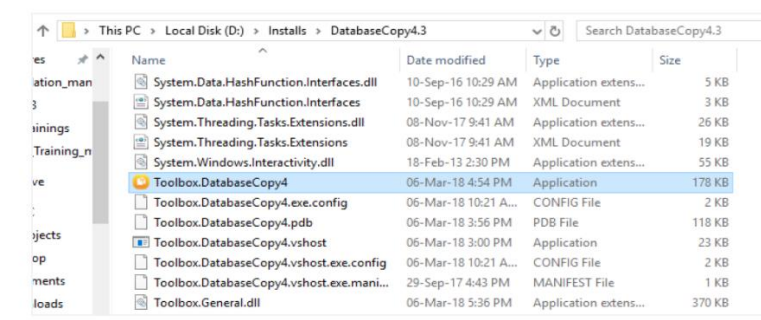


図19. Database Migration Toolの実行ファイル

Database Migration Toolのユーザーインターフェイスには、3つのセクションがあります（図20）。

Source Database（ソースデータベース）(1)という最初のセクションでは、“Open”（開く）ボタンでソースデータベースファイルを選択できます。（データベースのデフォルトの場所は C : ¥ Program Files (x86) ¥ Common Files ¥ QSAR Toolbox ¥ Ver 3.4 ¥ DB）。

Toolbox 4.4 (2) という次のセクションは、ソースデータベースが転送されたデータベースを示しています。デフォルトではアプリケーションはインストールデータベース（toolboxv21など）に接続するよう事前に設定されています。3番目のセクションには、転送対象のカスタムデータベース/インベントリがリストになっています (3)。データベースファイルを選択すると（最初のセクション）、使用可能なカスタムデータベース/インベントリのリストが自動的に読み込まれ、ユーザーはそれらの「すべて」又は「一部のみ」を転送するかどうかを選択できます。移行のプロセスは、“Start Transfer”（転送の開始）ボタン (4) をクリックして開始します。

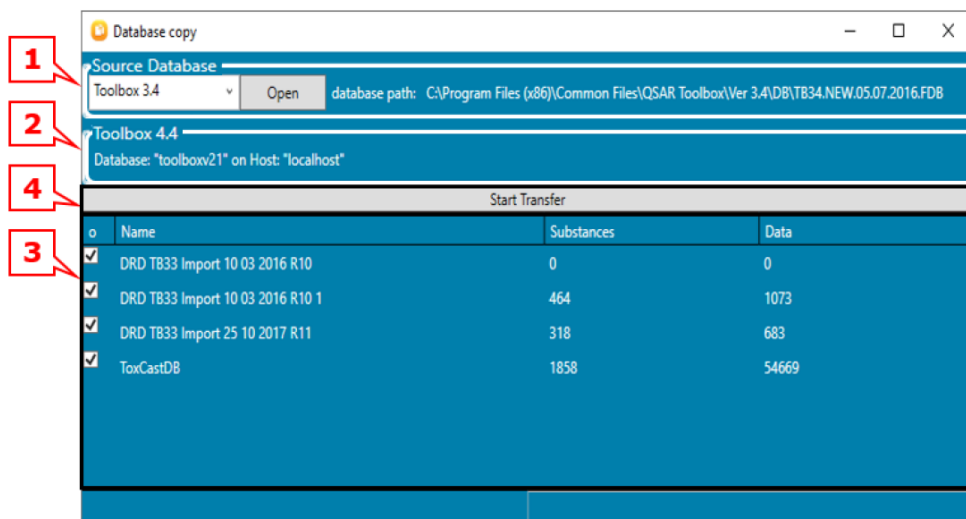


図 20 . Toolbox v.3.4 からカスタムデータベースを転送するときの Database Migration Tool 画面

一度開始すると、完了するまでプロセスを中断できません。転送プロセスにはデータベースのサイズに依存し数分かかります。

Database Migration Toolの詳細については、ダウンロードしたパッケージに含まれているユーザーマニュアルを参照してください。

2. QSAR Toolbox v4.x から QSAR Toolbox v4.4 へのカスタムアイテム転送方法

a. カスタムプロファイラーの転送

現在、Toolbox v4.x（つまり、Toolboxバージョン4.0、4.1、4.2、4.3）からToolbox v4.4にプロファイラーを自動的に転送できるツールはありません。

ユーザーは、カスタムプロファイラーに対応するディレクトリから手動でコピーし、Toolbox v4.4のプロファイラーのディレクトリに貼り付ける必要があります。

Toolbox v.4.3 プロファイラーのデフォルトディレクトリ : C:\Program Files (x86)\Common Files\QSAR Toolbox 4.3\Config\Profilers

Toolbox v.4.4プロファイラーのデフォルトディレクトリ : C:\Program Files (x86)\Common Files\QSAR Toolbox 4.4\Config\Addins\LMC.Toolbox.Server.Profiling

b. カスタムデータベースの転送

Database Migration Tool は、以前の Toolbox バージョン (Toolbox v.4.x を含む) からすべてのカスタムデータベースを現在のバージョンの Toolbox に転送できるように修正されました。

Database Migration Toolは、次のリンクからダウンロードできます。

[Download Database Migration tool](#)

Database Migration Toolのユーザーインターフェイスには、3つのセクションがあります (図21)。

Source Database (ソースデータベース) (1) という最初のセクションは、ソースデータベース (現在のToolboxバージョンに転送される前のデータベース) の選択ができます。。選択可能なすべての Toolboxデータベースがドロップダウンメニューに表示されます。データベースの正確なバージョンを選び “Connect” (接続) ボタンをクリックします。Toolbox 4.4 (2) と呼ばれる次のセクションは、ソースデータベースの転送先のデータベースを示しています。デフォルトでは、アプリケーションはインストールデータベース (toolboxv21など) に接続するように事前設定されています。3番目のセクションには、転送対象のカスタムデータベース/インベントリが列挙されています (3)。データベースファイルを選択すると (最初のセクションにて)、利用可能なカスタムデータベース/インベントリのリストが自動的にロードされます。これでユーザーはそれらすべてを転送するか、一部のみを転送するかを選択できます。移行のプロセスは、“Start Transfer” (転送の開始) ボタン (4) をクリックして開始します。

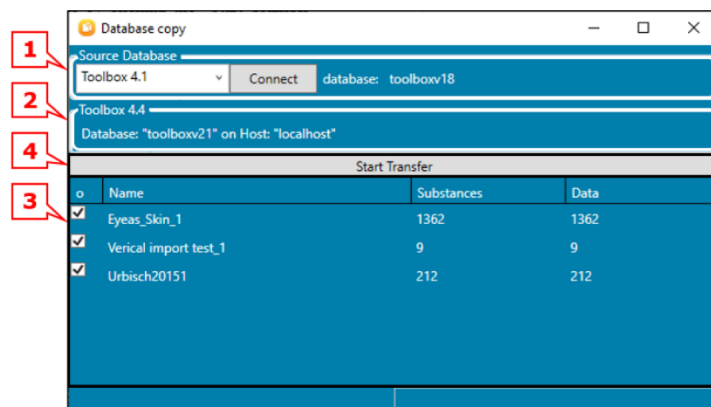


図21. Toolbox v.4.xからカスタムデータベースを転送するときの *Database Migration Tool* (データベース移行ツール) 画面

IV. 今までお使いの Toolbox バージョンの削除方法

1. QSAR Toolbox v3.x の削除

コンピューターのコントロールパネルから Toolbox の利用可能な 3.x バージョンを直接アンインストールします : Control Panel¥All Control Panel Items¥Programs and Features
 QSAR Toolbox のアンインストール後、データベースは削除されません。手動で削除する必要があります。

2. QSAR Toolbox v4.x の削除

QSAR Toolbox 4.x の完全な削除は、1) プログラムのアンインストールと 2) データベースの削除の 2つのステップで行われます。

a. QSAR Toolbox のアンインストール

コンピューターのコントロールパネルから Toolbox の利用可能な 4.x バージョンを直接アンインストールします :

Control Panel¥All Control Panel Items¥Programs and Features

QSAR Toolbox をアンインストールすると、Toolbox アプリケーションのみが削除されます。

データベースは別途、削除する必要があります。

b. Toolbox データベースの削除

古い Toolbox データベースを保存していると、多くのメモリが消費されます。コンピューターのスペースを空けるために、データベース削除ツールを使用して、古い Toolbox 4.x データベース（つまり、Toolbox4.0、4.1、4.2 のデータベース）を削除できます。

この削除ツールは、以下のリンクからダウンロードできます：

<http://toolbox.oasis-lmc.org/downloads/tools/ToolboxDatabaseManagement.zip>

ツールがダウンロードされたら、パッケージのコンテンツを抽出し、ToolboxDatabaseManagement 実行ファイルをダブルクリックします（図 2 2）。

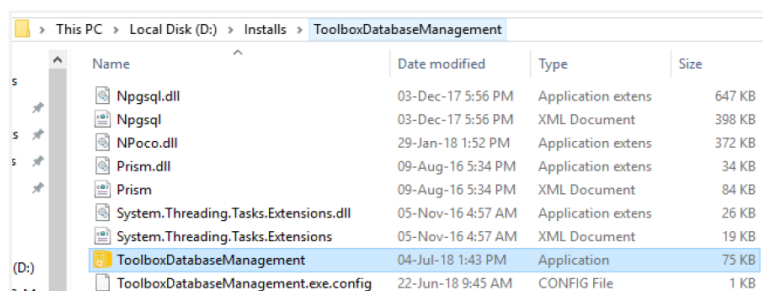


図 2 2 . ToolboxDatabaseManagement 実行ファイル

PostgreSQL のポートとパスワードを入力し（1）、"Connect"（接続）をクリックします（図 2 3）（ステップ 1. 3 参照）。

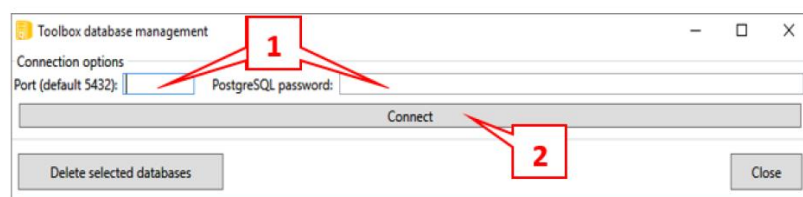


図 2 3 . PostgreSQL のポートとパスワードの入力

設定は次のとおりです。port : 5432 (デフォルト) ;パスワード : postgres (推奨)

注 : 変更したパスワードを忘れてしまった場合は、次のリンクにある手順に従って、PostgreSQL のパスワードをリセットしてください。

<http://toolbox.oasis-lmc.org/content/documents/ResettingPostgreSQLPassword.pdf>

Toolbox v 4.x から利用可能なすべてのデータベースが表示されます。削除する古いデータベースを選択し (1)、“Delete selected database”(選択したデータベースを削除する)をクリックします (2) (図 24)。

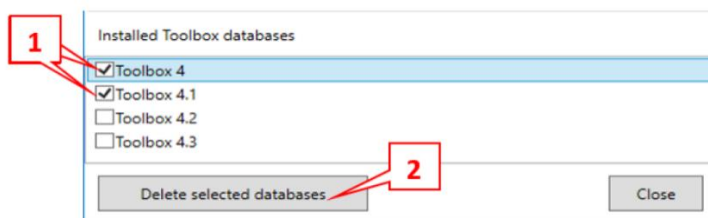


図 24 .削除する古いデータベースの選択

V. OASIS Metapath について

ブートストラップアプリケーションの OASIS メタパスアイテムをクリックし、画面上の指示に従います。

VI. 現行の問題点について

➤ 制限されたユーザーアカウントでの QSAR Toolbox の実行

リモート接続モードで実行しているとき、QSAR Toolbox サーバーを実行するには管理者権限が必要です。それらはアプリケーションがポートを開くことやクライアント接続を待ち受け状態にするために必要です。

OECD

2, rue André Pascal

75775 Paris Cedex 16

France

Tel.: +33 1 45 24 82 00

Fax: +33 1 45 24 85 00

ehscont@oecd.org